

2021 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	橋本 卓也
研究機関名	千葉大学
所属部署名	大学院理学研究院
役職名	特任准教授
研究課題名	新たな分子結合の創発と材料・医薬への応用
研究実施期間	2021 年 4 月 1 日～2022 年 3 月 31 日

研究成果の概要

本研究では、材料から創薬まで様々な応用が見込まれる分子を繋ぐ新技術を新たに創発することを目指している。具体的にはボロン酸とヒドロキサム酸という有機化合物からなる「ジオキサザボロール動的共有結合」を、作りやすさと使いやすさを兼ね備えた可逆性のある結合様式として開発することをめざしている。

当該年度の研究目標としては、この新たな動的共有結合の基本物性の解明と、本結合を利用したかご状分子構築を掲げていた。まずは動的共有結合としての可能性が全く未知であるこのジオキサザボロールの基本物性を、動的共有結合として最も重要な要素である結合の平衡定数の観点から精査した。その結果、四置換炭素に結合したヒドロキサム酸とオルト位にメチル基を有する芳香族ボロン酸の組み合わせが、結合生成系の安定化に大きく寄与すると結論された。

続いて、以上の検討結果を踏まえたビスボロン酸とビスヒドロキサム酸リンカー分子を合成し、2対2の四角形かご状分子構築を試みた。その結果、クロロホルム中空気下で数時間加熱することで、収率よく目的とした2×2かご状分子構造体を得られることが確認された。さらに本研究の中心課題として、サイズや形状の異なる種々のかご状分子の構築を実施した。まずは2×2かご状分子構築のかごサイズの多様化を狙い、それぞれ3つずつのビスボロン酸とビスヒドロキサム酸を合成し、これらリンカー分子の組み合わせにより9種類の縦横の辺がことなるかご状分子構築を達成した。さらにトリボロン酸と、ビスヒドロキサム酸の組み合わせから、良好な収率で三角柱（バレル型）構造体を得ることに成功した。一部のかご状分子についてはX線結晶構造解析による構造同定まで成功している。

今後はかご状分子の基本物性解明と応用展開、本知見に基づいた共有結合性有機構造体の合成について検討を行っていく予定である。